種々のSaxon-Hutner型定理

堀　　淳　一（北大理）

（３月１６日受理）

１．序

１９４９年にSaxon と Hutner は、強さの異なる２種類のδポテンシャルＡ，Ｂが規則的に配列している２原子Kronig-Penneyのスペクトルを調べＡのみからなる１原子格子においても禁止されているエネルギーは、これらの混つた２原子格子においてもやはり禁止されることを示した。[1] それ以来この結果は“Saxon-Hutner の定理”とよばれてしばしば引用されてきた。しかしその間に、もともとSaxon と Hutner が証明した範囲をこえて、random lattice の場合やδポテンシャル以外の場合に対しても同じ名前で（証明のないまま）引用されるようになり、その内容が次第にあいまいなものになつて来ているように思われる。最近筆者はrandom lattice のスペクトルを研究している中に、考えている系のspecialization の程度に応じて、いろいろな形のSaxon-Hutner 型の定理がなりたち得ることに気がついた。それに伴つていわゆるSaxon-Hutner の定理の内容をもつと明確にすることが必要になり、またこれらの定理の名称をどうしたらよいか、という問題も起つて来て、これらについて目下苦吟している次第である。そこでもしお智恵を拝借出来ればと思い、中間報告をかねて簡単にそれらの内容をかいてみることにした。

ここではかりにそれらを、内容の広い順に
“Saxon-Hutner の一般定理”，“Saxon-Hutner の大定理”(major theorem)，及び“Saxon-Hutner の小定理”とよんでおく。定理の立て方やその内容、或は名称等について御意見をきかせていただければ幸である。

堀 淳 一

2. Saxon-Hutner の一般定理

さし当つて話を1次元且つ2行2列の伝達行列によつて記述出来る場合に限る。伝達行列は通常 unimodular であるが、例えば nonisotopic な random lattice の振動をとり扱う場合には unimodular でない行列が現われるので、一般に unimodular でない場合も含めておく。

Random lattice は、その上を一定の向き（ここでは右向きとしておく）に進むときに、いくつかの種類（有限個でも可附番或は非可附番無限個でもよい）の伝達行列が、多少とも不規則に次々に現われて来るような格子である。伝達行列の種類を添字(i)または添字の組(i, j) 等で区別し、$Q^{(i)}$等とかくことにしよう。これらの中の特定の1つ、例えば$Q^{(j)}$によつて記述される規則格子を、考えている random lattice の j 種の constituent (regular) lattice とよぶことにする。$Q^{(j)}$が unimodular, 即ち $|Q^{(j)}|=1$ である場合には j 種の constituent lattice は物理的実在性をもつが、$|Q^{(j)}|\neq 1$ のときにはこれは固有振動数または固有エネルギーを一般にもたない vitual な格子となる。

$Q^{(i)}$の固有ベクトルを$\phi_{\pm}^{(i)}$, 固有値を$\theta_{\pm}^{(i)}$とする。$Q^{(i)}$は振動数ωまたはエネルギーEをパラメーターとして含むから、勿論$\phi_{\pm}^{(i)}$, $\theta_{\pm}^{(i)}$等もその函数である。$\theta_{\pm}^{(i)}$が実で相異なるときには、絶対値の大きい方に−という添字を与えることにする。$\phi_{+}^{(i)}$以外の任意のベクトルϕに$Q^{(i)}$をくり返して作用させると、次第に$\phi_{-}^{(i)}$に近づいていくことは明らかである。$Q^{(i)}$ が複素行列のときにはこれは

$$Q^{(i)}=\begin{pmatrix} A^{(i)} & B^{(i)} \\ B^{(i)*} & A^{(i)*} \end{pmatrix} \tag{2.1}$$

という形をしている。このとき固有ベクトル$\phi_{\pm}^{(i)}$の成分の比$\phi_{\pm 1}^{(i)}/\phi_{\pm 2}^{(i)}$ の絶対値は1であるから、$\phi_{\pm 1}^{(i)}=\exp(i\delta_{\pm}^{(i)}/2)$, $\phi_{\pm 2}^{(i)}=\exp(-i\delta_{\pm}^{(i)}/2)=\phi_{\pm 1}^{(i)*}$ とかいてよい。$\delta_{\pm}^{(i)}/2$ を$\phi_{\pm}^{(i)}$ の "phase" とよぶ。一般のベクトルϕの phase $\delta/2$ を

$$\delta \equiv -i\log(\phi_1/\phi_1^*) \tag{2.2}$$

で定義すると、$\phi=\phi_{\pm}^{(i)}$のときδは$\delta_{\pm}^{(i)}$に一致する。$Q^{(i)}$が実行列のときには

これは (2.1)の形をもたず、$|\phi^{(i)}_{\pm 1}/\phi^{(i)}_{\pm 2}|$ は一般に1でない。このときにはphaseを

$$\delta \equiv \tan^{-1}\{\pm\log(\mp\phi_1/\phi_2)\} \tag{2.3}$$

で定義する。符号は $\delta/2$ の値域が $(-\pi/2, \pi/2)$ になるようにとると都合がよい。

何れの場合にも、$\phi^{(i)}_{+}$ 以外の勝手なベクトルに $Q^{(i)}$ をくり返してかけたとき、その phase は $\phi^{(i)}_{-}$ の phase $\delta^{(i)}_{-}/2$ に近づき、しかもその近づき方は一方側からであることが示される。

Random lattice では、次々といろんな $Q^{(i)}$ が random に operate されて行くわけであるが、もし与えられた振動数またはエネルギーに対して、$\theta^{(i)}_{\pm}$ がすべての i に対して実であり、且つ集合 $\{\delta^{(i)}_{-}\}$ 及び $\{\delta^{(i)}_{-}\}$ の張る空間が互に重なり合わないならば、上述のことから、ベクトルの phase は最後には $\{\delta^{(i)}_{-}\}$ の張る区間の中に trap されてしまつて、もはやその外に出られなくなる。従つて与えられた振動数またはエネルギーにおいて、スペクトル密度は0にならなければならない。$\theta^{(i)}_{\pm}$ が実であるという条件はこれも上述のことから、与えられた振動数またはエネルギーが i 種の constituent lattice のスペクトルの gap の中にあることを意味する。$|Q^{(i)}| \fallingdotseq 1$ のときには i 種の constituent lattice は実はスペクトルはもたないが、このときにも $\theta^{(i)}_{\pm}$ が実でない領域を band,実である領域をスペクトルの gap と呼ぶことにする。かくして、

<u>Saxon-Hutner の一般定理：</u> 2行2列の実数伝達行列または (2.1)の形の複素伝達行列によつて記述される系において、(A)与えられた振動数またはエネルギーが、すべての constituent regular lattice に対してスペクトルの gap の中にあり、且つ(B)その振動数またはエネルギーに対して $\{\delta^{(i)}_{+}\}$ と $\{\delta^{(i)}_{-}\}$ の張る区間が互に重なり合わないならば、random lattice においてもそこのスペクトル密度は0である。

が得られる。

3．Saxon–Hutner の大定理と小定理

Saxon–Hutner の一般定理は2行2列の実数行列または (2.1)の形の複素行列によつて記述されるすべての系に対してなりたつが、行列の形によつては条件(B)が条件(A)の必然的な結果として出てくる場合がある。例えばいくつかの異なる原子からなるnon–isotopic な random lattice の振動は、

$$T^{(i,j)} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -g^{(i)}\omega^2 & h^{(j)} - g^{(i)}\omega^2 \end{pmatrix} \tag{3.1}$$

の形の伝達行列によつて記述される[2]。但し g は原子の質量とその右側の力の常数との比、h は左側の力の常数と右側の力の常数との比で、ともに隣接する原子の種類によつてその値が幾通りにか変化するので、それを添字(i)及び(j)で区別した。この場合には条件(B)は条件(A)から出てくることが示される。即ちこのような系に対しては。

Saxon–Hutner の大定理：　与えられた振動数またはエネルギーが、系のすべてのconstituent lattice に対してスペクトルのgapの中にあればその振動数またはエネルギーにおいてスペクトルの密度は0である。

この大定理は、constituent lattice の中にvirtual なものが含まれていても、上述のようにvirtual な格子がスペクトルのgapを伝達行列の固有値が実である区間として定義しさえすればなりたつ。これに対して、constituent lattice としてreal な(即ち $|Q^{(i)}|=1$ であるような)もののみを考えた。

Saxon–Hutner の小定理：　与えられた振動数またはエネルギーが、系のすべてのreal な constituent lattice に対してスペクトルのgapの中にあれば、その振動数またはエネルギーにおいて、スペクトルの密度は0である。

が考えられる。すべてのconstituent lattice が real ならば、大定理と小定理は同じものになるが、virtual な constituent lattice があ

る場合には、一般に小定理はなりたたない。

Isotopic な random lattice の場合には、$h^{(j)}$はすべて1、従つてすべての伝達行列がunimodular であるために、小定理がなりたつ。この事実は2原子格子に対してはよく知られているが、多原子の場合にもなりたつのである。

ポテンシャルの強さ$V^{(i)}$とその間の間隔$\ell^{(j)}$とがともにrandom に変化するKronig-Penney モデル（generalized disordered Kronig-Penney model）の電子エネルギー状態は

$$Q^{(i,j)}=\begin{pmatrix} \left\{1+\frac{iV^{(i)}}{2k}\right\}\exp(i\ell^{(j)}k) & \frac{iV^{(i)}}{2k}\exp(-i\ell^{(j)}k) \\ -\frac{iV^{(i)}}{2k}\exp(i\ell^{(j)}k) & \left\{1-\frac{iV^{(i)}}{2kk}\right\}\exp(-i\ell^{(j)}k) \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

という伝達行列によつて記述される。kは波数である。この場合にも一般定理における条件(B)は(A)から導かれることが示される。すべての(i，j）に対して$|Q^{(i,j)}|=1$であるからこの場合にもSaxon-Hutnerの小定理がなりたつのである。

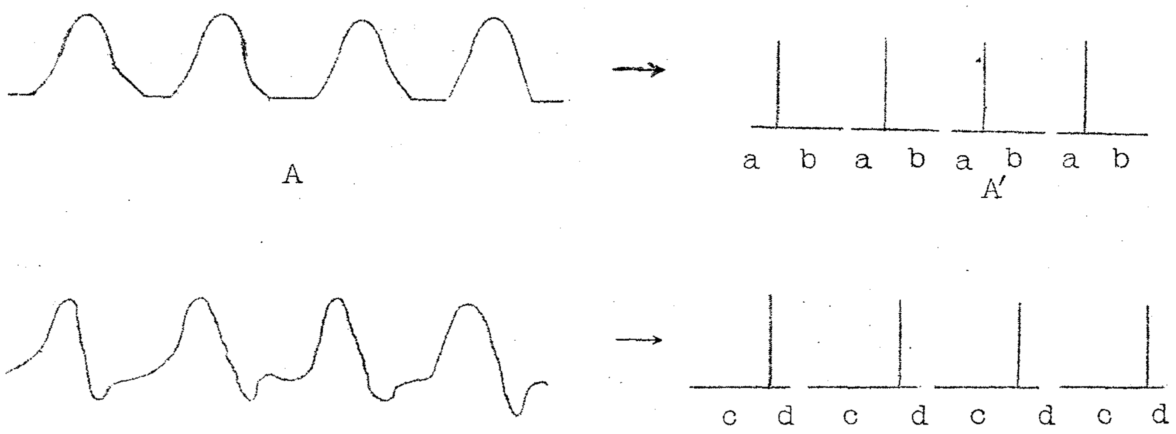
とくに$V^{(i)}$が一定の場合、即ちいわゆる"liquid metal"の場合には、条件(A)はBorland[3]が前に導いたGap-persistence の条件とまさに一致する。即ちBorland の結果は実はSaxon-Hutner の小定理の特別な場合にほかならなかつたのである。$\ell^{(j)}$が一定の場合には、明らかに小定理はもともとのSaxon-Hutner の定理のrandom lattice 及び多原子の場合への拡張になつてくる。なおdisordered lattice の振動数スペクトルに対するMatsuda の定理が、やはりこの小定理の特別な場合になつているという事実は興味がある。[4) 5)]

4．"Saxon-Hutnerの定理がなりたたない場合"について

もともとのSaxon-Hutner の定理は、その適用範囲を拡張すれば、上の"Saxon-Hutner の小定理"になると考えてよいであろう。ところが実はここにも少し問題があるのである。例えばKerner[6)]は箱型ポテンシャルの場合にはSaxon-Hutner の定理がなりたたないことを示したが、このこと

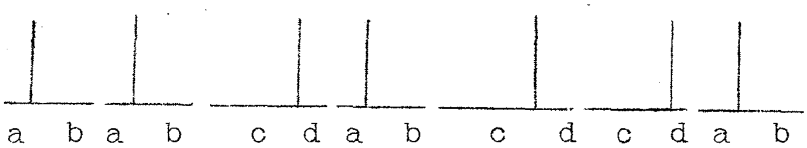
は一見、間にポテンシヤルが0の区間がはつきりきまつていさえすれば、任意のポテンシヤルの列が適当なδポテンシヤルの列にひき直される、というBorland[2)]の結論と矛盾する。なぜなら上述のように、δポテンシヤルの列に対しては Saxon−Hutner の小定理がなりたつから。

この矛盾は次のように説明される。第1図の左側に示された2種の規則格子A，Bをδポテンシヤルの列にひき直すと、それぞれ右側のA′，B′のようになつたとしよう。δポテンシヤルの高さは同じになつたものとする。これらのポテンシヤルを混ぜて random lattice を作る



B　　　第1図　　　B′

と、それに対応するδポテンシヤルの列は第2図のようになるであろう。ポテンシヤルの間隔は b+a，b+c，d+a，d+c の4通りを生ずる。



第2図

従つて constituent lattice としてこれら4種類の間隔をもつ規則格子を考えれば Saxon−Hutner の小定理がなりたつことになる。しかし constituent lattice としてはじめのA，Bを考えると Saxon−Hutner の定理は必ずしもなりたたないのである。

従つて、上の“小定理”と、Kerner がなりたたないといつた Saxon−Hutner の定理とやはり等価ではない。一般に、我々の定理においては、1つ1つの伝

違行列のえらび方、即ち constituent lattice のえらび方にかなり大巾な自由度がある。これは一面では利点であつて、例えば Matsuda の定理を Saxon-Hutner の小定理の特別の場合と考えることが出来るのはこの自由さのおかげである。しかし他方ではこの自由さのために、物理的には上記のような混乱が生ずることになるのである。この点を如何に調節したらよいであろうか。

1) D.S. Saxon & R.A. Hutner, Philips Res. Rep. 4, [illegible] (1949) 81.
2) J. Hori & T. Asahi, Prog. Theor. Phys. 17, (1957) 523.
3) R.E. Borland, Proc. Phys. Soc. 78, (1961) 926.
4) H. Matsuda, Prog. Theor. Phys, in press.
5) J. Hori, Prog. Theor. Phys, in press.
6) E.H. Kerner, Phys. Rev. 95, (1954) 687.